

1

明細書
イオンチャップ質量分析計を用いた探知方法及び探知装置
技術分野

背景技術
国際紛争の深刻化に伴い、テロの防止や治安維持のため、爆発物を探知するための探知装置が開発されている。探知装置では、X線透過を用いた手荷物検査装置が空港を中心に広く用いられている。X線透過装置などは、対象を塊として認識し、形状等の情報から危険物を判別するため、パック検出と呼ばれる。一方、ガス分析をベースとした探知性はトレース検出と呼ばれ、化学分析機能から物質の同定を行う。トレース検出には、カバンなどに付着した爆薬の成分を検知できるという特徴がある。社会的にセキュリティ強化が求められる、パック検出とトレース検出を組み合わせて、より高精度に危険物を検知する装置が望まれている。

一方、機器なしルートで持ち込まれる爆薬類の発見のため、民間等でも探知装置が使用される。装置では主にバック検出装置と麻薬探知大が使用されているが、麻薬探知大に代わる禁制薬物用のトレース分析装置が熱望されている。

トレース検出では、イオンモビリティスペクトラスコビー、ガスクロマトグラフィなど様々な分析方法が試みられている。検知装置として重要なスピード、感度、選択性を全て兼ねえた検査の開発に向けて研究が進められている。

- 5 本発明は爆発物や麻薬の探知技術に係わり、特に質量分析計を用いた探知装置に関する。
- 10 空気吸引入口¹は絶縁パイプ²を介して「イオン源³」に後流され、イオン源³は排気口⁴、絶縁パイプ⁵を介して空気供給用ポンプ⁶に接続される。イオン源³は針電極⁷と第1網電極⁸と中間圧力部⁹と第2網電極¹⁰とを備え、針電極⁷は電源¹¹に接続され、第1網電極⁸と電源¹¹と第2網電極¹⁰は、ガス加速度電極¹²に接続される。中間圧力部⁹は排気口¹³を介して真空ポンプ¹⁴に接続される。中間圧力部⁹の後方に静電レンズ¹⁵の後側に質量分析部¹⁶が配置される。検出器¹⁷は、静電レンズ¹⁵からの検出信号は增幅器¹⁸からデータ処理部¹⁹に供給される。検出器¹⁷は荷電²⁰の種類によっては荷電²⁰の質量数^{m/z}（イオンの質量数^m、電荷²⁰を判定し、被検物体に含まれている荷電²⁰を判定する。
- 15 このデータ処理部¹⁹は、質量判定部¹⁰、系物判定部¹⁰、系物判定部¹⁰とを備えている。また、警報駆動部¹⁰より駆動される警報表示部¹⁹には、表示部¹⁰、106、107、108が配置される。
- 20 上記実技術には、次のような問題があつた。
- 25 上記技術では、イオン源³で生成したイオンのm/zを用いて薬物判定を行ふ。從って、探知する薬物と同じm/zを有するイオンを生成する化學物質が存在した場合、薬物が無いにもかかわらず警報を表示してしまうといった誤認の可能性が高かつた。

3

より具体的には、手荷物中の薬剤剤を探知している際に、手荷物に入られた物品の成分に反応して膨胀を発してしまった際図があつた。これは、イオンを分析する質量分析部の選択性が低い事が原因であり、依然同一のm/zを有する覚醒剤由来のイオンと化粧品由来のイオンを区別できなかったために起る。

質量分析装置において選択性を高める方法として、タンデム質量分析法が採用されている。タンデム質量分析法を実施するための装置として、三重四重極質量分析計や四重極イオントラップ質量分析計などがある。

タンデム質量分析法では、通常、

(1) 1段目の質量分析

質量分析を行い、イオノ源で生成されたイオノンのm/zを測定する。
(2) 選択
様々なm/zを有するイオンの中から、特定のm/zを有するイオンを選択する。

15 (3) 解析

選択されたイオン(プリカーサーイオン)を中心ガスなどとの衝突により解離させ、分解物イオン(フラグメントイオン)を生成する。

(4) 2段目の質量分析

フラグメントイオンの質量分析を行う。

20 というステップが用いられる。プリカーサーイオンが解離する場合、分子中のどの部位が切れるかは、部位ごとの化合物結合の強さに依存する。従って、フラグメントイオンを分析すると、プリカーサーイオンの分子構造情報を纏めて質量スペクトルが得られる。走って、イオン源で生成されたイオンのm/zが偶然同じでも、フラグメントイオンの質量スペクトルを覗く事で探知の対象物が含まれているか否かを判別できる。

4

次つて、第16図に示した後述の探知装置において、質量分析部15を三重四重極質量分析計や四重極イオントラップ質量分析計に置き換え、タンデム質量分析法を行えば、選択性が向上し、膨胀を低減できる。しかししながら、タンデム質量分析法は通常の質量分析法に比べて時間がかかるなり、探知装置に求められる探知スピードが遅くなるといった問題があつた。

以上の理由により、高い選択性と速い探知スピードとを兼ね備えた探知装置が望まれていた。

本発明の目的は、高速のスリーニングモードと、高選択性の精査モードとを併用する事により、高速かつ誤報の少ない検査物、禁制薬物等の探知装置を提供することにある。

画面の簡単な説明

第1図は、本発明の一実施例のアルゴリズムを示す図であり、第2図

15 は、本発明の一実施例のアルゴリズムの一例を示す図であり、第3図は、本発明を実施するための装置構成の一例を示す図であり、第4図は、本発明を実施するためのインジケータの構成の一例を示す図であり、第5図は、本発明を実施するための蒸気乾燥部の構成の一例を示す図であり、

第6図は、本発明の一実施例での電圧印加のタイミングを示す図であり、第7図は、本発明の一実施例でのM/S/M/S分析の手順を示す図であり、第8図は、

20 第9図は、本発明の一実施例での分析の手順を示す図であり、第10図は、本発明のタンデム質量分析法を示すロードチャート図であり、第11図は、本発明の一実施例のアルゴリズムを示す図であり、第12図は、リング電極とエンドキャップ電極に印加する高周波電圧のタイミングを示す図であり、

第13図は、閉じ込め選択時間にエンドキャップ電極に印加された電圧の周波数を示す図であり、第14図は、本発明の一実施例でイオン阱に込めた荷電が同時に進行する状況を示す図であり、第15図は、本発明の

5

6

一実施例でイオン閉じ込めしょ解離が同時に進行する際のエンドキャッチャ基板に印加された高周波電圧の周波数を示す図であり、第14回は、本発明の一実施例のアルゴリズムを示す図であり、第15回は、本発明の一実施例の装置構成を示す図であり、第16回は、危険物探知用に用いられる従来の質量分析計の構成を示す図である。

発明を実施するための装置の形態

以下、本発明の実施の形態について、図を用いて詳細に記載する。

第1回は本発明の一実施例のアルゴリズムを説明する図である。

- 10 本実施例では、質量スペクトルを取得する第1の判定ステップ201と、第1の固有のm/zのイオンが存在するか判定する第1の分析ステップ202と、前記第1の判定ステップ202と、前記第1の分析ステップ202の判定結果に応じてタンデム質量分析法を行う前の分析ステップ203と、第2の固有のm/zのイオンが存在するか判定する第2の判定ステップ204と、前記第2の判定ステップ203による判定結果に応じて警報を発動する告警ステップ205を取ける。ステップ201ヒステップ202による測定操作をスクリーニングモード、ステップ203ヒステップ204による測定操作を精査モードとする。
- 15 試料を用いた場合、試料ガスから生成されるイオンをステップ201において分析し、探知対象物由来のイオンに相当するm/zを有するイオンが検出されたかどうかをステップ202において判定する。例えば、質量剤の一種であるアンモニウムを正の大気圧化イオン化モードでイオン化すると、アンモニア分子にプロトントが付加した陽離子イオン(NH₄)⁺(Nは試料分子、Hはプロトン)が生成される。この陽離子イオンのm/zは38であるため、ステップ202ではm/zが138のイオンが検出されたかどうかを判定する。(第1の判定)
- 20 において分析し、探知対象物由来のイオンに相当するm/zを有するイオンが検出されたかどうかをステップ202において判定する。例えば、質量剤による質量スペクトルをもあらかじめ測定してデータベースとし、このデータベースを参照する事により精度の高い判定が可能となる。
- 25 第1回で示したアルゴリズムを用いた探知方法を、より具体的に説明すると以下の様になる。探知中は、まずはスクリーニングモード(すなわちステップ201における判定とステップ202による判定)を実行し、

これを繰り返す事になる。ステップ2 0 1に要する時間を0、1秒に設定し、1回の測定結果を算出しからステップ2 0 2により判定する。と、トーカルの保険時間はおよそ1秒である。ステップ2 0 2によると常に、探査対象物が存在すると見られる場合は、精査モードに移行する。ステップ2 0 1に要する時間を0、5秒とし、やはり10回の測定結果を算出してからステップ2 0 4により判定すると、ステップ2 0 1から始まるスクリーニングモードを含めてトータルで約6秒程度の保険時間になる。セキュリティゲートなどに付属する手荷物検査の場合、通常は探査装置への手荷物の搬入、深く、探査装置からの手荷物の搬出を含めて数秒で終わなければならない。従って、実際に保険に費やす事が出来る時間は1～2秒であるが、ほとんどの手荷物には保険対象物は入っていないと想定されるので、スクリーニングモードによりおよそ1秒で保険を終了させ事が出来る。此つて、第1回に示したアーチゴズムを用いる事により、まれに精査モードまで行くため時間がかかる事があっても、保険に要る平均時間として手荷物一つ当たり1～2秒程度に抑えれる事ができ、セキュリティゲートにおいて荷物の搬れを著しく妨げる事無く手荷物の検査が出来る。また、最終的に精査モードによりタンデム質量分析法に基づく判定を行うため、選択性が高く、精度を低減させることが出来る。

以上の様に、タンデム質量分析法により精査するには時間がかかるため、ステップ2 0 2の判定の結果ステップ2 0 3に移行した後、すなわちスクリーニングモードから精査モードへと移行した場合、この段階で警告ランプを点光させるなど、操作件数が増加しやすい信号を出す事と良い。

第2回は、本研究を実施するための具体的な装置構成を示す図である。質量分析部に、四重極イオントラップ質量分析計（以下では、イオント

ラップ質量分析計と記載する）を使用した例を示す。イオン源2 0 1にはガス導入管2 1、および排気管2 2 a、2 2 bが組みされている。試料ガス導入口からのガスは、排気管2 2 a、2 2 bに組合されたポンプにより吸引され、ガス導入管2 1を介してイオノン源2 0 1に導入される。
 5 イオン源に導入されたガス中に含まれる成分は、一部がイオン化される。イオン源により生成したイオンおよびイオン源より導入されたガスの一郎は、第1細孔2 3、第2細孔2 4、第3細孔2 5を介して真空ポンプ2 6により排気された真空部2 7に取り込まれる。これらの細孔は、直径0、3mm程度であり、細孔の開口する電極はヒーター（図示せず）により10、100℃から300℃程度で加熱される。第1細孔2 3から取り込まれなかつたガスは、排気管2 2 a、2 2 bからポンプを介して装置の外前に排気される。
 10 細孔2 3、2 4、2 5の開口する電極の間は振動制御節2 8、2 9に接続しており、吸引ポンプ2 3により排氣される。吸引ポンプ2 3に接続しており、吸引ポンプ2 3により排氣される。吸引ポンプ2 3に接続するロータリポンプ、スクロールポンプ、またはメカニカルプースタポンプなどが用いられるが、この領域の排气にて一ポーポ分子ポンプを使用することも可能である。せたば、細孔2 3、2 4、2 5の開口する電極には電圧が印加できるようになっており、イオン透過率を向上させる20と共に、残留する分子との衝突により、断熱膨張で生成したクラスターイオンの開発を行う。

第2回では、吸引ポンプ2 3に排気速度900リットル/分のスクロールポンプ、真空部2 7を排気する真空ポンプ2 6に排気速度300リットル/分のデータ分子ポンプを使用した。データ分子ポンプの前玉25を排気するポンプとして、吸引ポンプ2 3を採用している。第2細孔2 4と第3細孔2 5の圧力は約1トールである。また、第2細孔2 4の開口する電極を除去し、第1細孔2 3と第3細孔2 5の二つの細孔

6 構成された絶縁物気泡にすることも可能である。ただし、上記の場合
に比較して、炭素のガス量が増えるので、使用する真空ポンプの排氣
速度を増やす、絶縁筒の距離を離すなどの工夫が必要となる。また、こ
の場合も、兩隔離間に電圧を印加することは重要なこととなる。

5 生成したイオンは第3細孔 2.5 を通過後、収束レンズ 3.1 により取扱
される。この電場レンズ 3.1には、通常 3 枚の透鏡からなるアイソント
リレンズなどと用いられる。イオンはさらにもスリット電極 3.2 を通過す
る。第3細孔 2.6 を通過したイオンは、収束レンズ 3.1 によりスリット
電極 3.2 の開口部に収束し、通過するが、収束されない中性粒子などは
このスリット部分に衝突して質量分析計内に行きにくい這樣となっている。
6 スリット電極 3.2 を通過したイオンは、多数の網状電極された内面電極
3.3 と外側電極 3.4 によりなる二重電極装置向器 3.5 により偏角かつ吸収
される。二重電極装置向器 3.5 では、内面電極の開口部より導びかした
外側電極の電界を用いて偏角かつ吸収している。この詳細は、既に専門
誌^{平-7-8-5-8}に記述している。

7 二重円筒型偏角器 3.6 を通過したイオンは、リンク電極 3.6 とエンド
キャップ電極 3.7、3.8 を通過されるとオシントラップ質量分析計に導
入される。ゲート電極 3.8 は質量分析計へのイオン入射のタイミング
を制御するためには駆動されている。つば電極 3.7a、3.9 b は、イオ
ンがリンク電極 3.6 エンドキャップ電極 3.7 a、3.9 b を保持する石
英リング 4.0 a、4.0 b に捕捉し、石英リング 4.0 a、4.0 b が捕獲す
るのを防ぐために設けられている。

8 イオントラップ質量分析計の内部には、ヘリウムガス供給管（図示せ
ず）からヘリウムガスが供給され、1.0 × 3 ポール電極の正面に保たれている
9 イオントラップ質量分析計は、質量分析計制御部（既示せず）により制
御される。質量分析計内に導入されたイオンは、ヘリウムガスと衝突し

でエネルギーを失い、交流電界により消耗される。撮されたイオン¹は、リンク電極 3 とエンジンドキャップ電板 3'、3'' に印加された高周波電圧を走査することによって、イオンの v_{\perp} に応じてイオントラップ質量分析計の外に放出され、イオン取り出しがれんズ 4 1 を経て検出器 5 4 2 により検出される。検出された信号は増幅器 4 3 によって增幅され、データ処理装置 4 4 にて処理される。

イオントラップ質量分析計は内部 (リンク電極 3 6 とエンジンドキャップ電板 3' 7'、3'' 7'' で囲まれた空間) にイオンを捕捉する伸性を有するので、要知り得物質の濃度が低く生成されるイオン数が少ない場合でもイオンの導入時間は長くなると検出できる点にある。従つて、試料濃度が低い場合でも、イオントラップ質量分析計のところでイオンの高精度高感度が可能であり、試料の前処理 (蒸留など) は非常に簡便できる。

第 3 図は、第 2 図に示す装置のイオン源部の拡大図である。試料ガス導入管 2 1 を通して導入されたガスは、いったんイオンドリフト部 4 10 5 に導入される。このイオンドリフト部 4 5 は高気圧状態にある。イナンダード電極 4 5 に導入された試料ガスの一端はコロナ放電部 4 6 に導入され、取り付ける電極 4 2 を通してイオン源側向外に排出される。

コロナ放電部 4 6 に導入された試料ガスは、針電極 4 7 に高電圧を印加する事で針電極 4 7 の先端附近に生成されるコロナ放電領域 4 8 に導入され、イオン化される。このとき、コロナ放電領域 4 8 では、針電極 4 15 7 から射出電極 4 9 に向かってドリフトするイオンの流れに直角に対向するような方向に試料ガスが導入される。生成したイオンは世界により向電板 4 9 の開口部 6 2 を通して、イオンドリフト部 4 2 に導入される。

このとき、向電板 4 9 と第 1 組孔 2 3 の開口部の間の電圧を 20 増加することにより、イオンをドリフトさせ、効率良く第 1 組孔 2 3 に導く事ができる。組孔 2 3 から導入されたイオンは、第 2 組孔 2 4

及び第3細孔 2.6 を通して、真空部 2.7 に導入される。

コロナ放電部 4.6 に流入するガスの流量は高濃度かつ安定に保有するため必要である。このため、排気管 2.2 には質量制御部 4.5 及びエンドキャップ 2.6 を設ける。

5 また、ドリフト管 4.5 やコロナ放電部 4.6、ガス導入管 2.1

などは、試料の吸着を防ぐ地点から、ヒーター

加熱しておくと良い。ガス導入管 2.1 や排気管 2.2 を通過するガス流

量は、ダイアフラムポンプのような吸引ポンプ 2.2 の容量及び配管のコ

ンダクタンスにより決定できることができるが、ガス導入管 2.1 や排気管

2.2 にも第3図に示した質量制御部 5.1 のよくな制装置を設けても

良い。吸引ポンプ 5.2 を、ガスの流れから見てオラン生成部（すなわち、

52 の内側の汚染（燃焼の灰等）による影響が少なくなる。

第4図は、本実明に係る装置のガス採取部の一例を示す図である。

採取装置は大きく分けて、本体 5.3、ガス吸引部 5.4、筐体 5.5、データ

15 放電装置 4.4 により構成される。ガス吸引部 5.4 として、ブローブ 6

6 を接続したガス導入管 1.1 を用い、手術刀 2.1 にブローブ 6 を近づけて手術刀周辺の空気を筐体 5.3 に吸引し、吸引を行う。

参考まで、本実明の一実施例におけるイオン・ラップ質量分析計の動作について説明するため、第5図、第6図にシングル電極とエンドキャッ

プ電極に印可する電圧のタイミングを示す。第5図は、第1図における

20 ステップ 2.0 での動作を表し、第6図は、ステップ 2.0 での動作を表す。

ステップ 2.0 において、イオン阱に注入するには、シングル電極

0.3 には、イオンがさらに入れるのを防止するためゲート電極に印可する高电压を印可する。リン・電極及びエンドキャップ電極に印可する高周波の振幅などを操作して、電解により内部に捕獲されたイオンの中から m/z の異なるイオンを調査する。次に、質量分析計外に伸出し、検出器で検出する事により質量スペクトルを得る。次に、残留イオノ除去時間 3.0 1 を受け、リンク電極に印可する高圧を切る事により質量分析計の内部に残留するイオンを除去する。

典型的には、イオン阱に注入時間 3.0 2 を 0.4 秒、質量分析時間 3.0 3 を 0.5 秒、残留イオノ除去時間 3.0 1 に 0.1 秒とし、0.1 秒で質量スペクトルを回路得する事が出来る。試料の濃度が希薄で、高い速度が必要な場合は、イオン阱じめ時間 3.0 2 をさらに長くして下さい。

次に、ステップ 2.0 での動作を新6圖を用いて説明する。イオン阱に注入時間 3.0 2 と質量分析時間 3.0 3 の動作はステップ 2.0 1 の場合と同じである。選択時間 3.0 4 では、イオン阱に注入時間 2.0 3 で閉じ込められた様なイオンの中から、定められた m/z を有するイオンを開放させ、それ以外のイオノを削除する操作を行う。この選択時間 3.0 4 では、例えばラビッドコミュニケーションズイン・マス・スペクトロ

メトリー社、7巻、1986頁(1993年)に開示されているフィルタード・フィールドを使用する事ができる。解離時間 3.0 5 では、選択時間 3.0 4 で選択された定められた m/z を有するイオンにエネルギーを与え、質量分析計内のヘリウムガスなどへ衝突させ、フラグメントイオンを生成する。イオン阱にエネルギーを与えるには、エンドキャップ電極間に高周波を印可し、イオンを質量分析計内で加速する。加速されたイオンはヘリウムなどのガスと衝突するが、その間にイオンの運動エネルギーの一割がイオンの内部エネルギーへと変換され、衝突を

25 20 パークする。また、ゲート電極に印可する電圧を調整し、イオンがゲート電極を通過して質量分析計に導入されるよう制御する。次に質量分析計

振り返るうちに内部エネルギーが蓄積されてイオンの中の化学結合の弱い部分が切断され解離が始まる。

・ タンデム質量分析法では、選択や解離の際にイオンの損失が生じるため、フランクトイオントンの良質ペクトルを得るためには十分な量のイオンをイオン阱にため3.02において間に込めておく必要がある。このため、典型的には、イオン阱にため時間3.0を0.4秒、質量分析時間3.0を0.05秒、選択時間3.0を0.03秒、解離時間3.0を0.01秒、残留イオン除去時間3.01を0.01秒とし、0.5秒で質量スペクトルを1回取得する。

分析分野において、質量分析法は様々な用途に用いられている。しかしながら、探知装置に質量分析法を用いた場合では、通常の分析とは状況が異なる点がある。

まず、通常の分析では極めて多くの成分を対象としているのに対し、探知装置では極めて限られた物質を検出対象とする。例えば、爆弾は爆薬を含めて作成されるため、主要な爆薬を最初に選択して探しすれば、れば、爆弾を見つける事ができる。また、通常の分析では物質の濃度などの定性が行われるが、探知装置は対象物の有無を判定できれば良い。そこで、探知装置において初めて有効な質量分析計の動作方法を第6回を用いて説明する。イオントランプ質量分析計において、閉じ込められたイオンを外部に取り出す際、質量流量の速度によって取り出し效率が異なる。すなわち、第6回分析時間3.03において、リンク電極間に印可する距離の増加率を増やし、短い時間で分析時間3.03が終了するようにならざると、質量分析計のみに取り出され検出まで到達するイオンが漏れ掉るため、感度が向かずという利点がある。しかしながら、分析時間3.03におけるリンク電極に印可する距離を増やすと、質量分析計が低下したり、所定のタイミングでイオンを排出されないた

め測定されたm/zが正しい値からずれるといった問題点があつた。そこで、第7回に示す様に、イオントランプ質量分析計を動かせる際、イオン阱にためのステップ2.06（イオン阱にため時間3.0に相当）と、イオン排出のステップ2.08（分析時間3.03に相当）の間に、特定のイオンを選択するステップ2.07（選択時間3.07に相当）を設けた。つまり、高速で質量測定する事による分解能の低下を、あらかじめ質量分析計に残るイオンのm/zを削除する事により補う事が可能である。具体的には、アンチエミシブの操作がボリュームをマサチャーシクする時はm/zが1.36の正イオンである。そこで、イオン阱で生成されたイオンをステップ2.06により質量分析計内に閉じ込め、次にステップ2.07においてm/zが1.36以外の値を有するイオンを排除し、m/zが1.36のイオンを選択的に残留させる。次に、イオン排出のステップ2.08において高速で質量測定し、質量分析計内に残っているイオンを効率よく質量分析計の外部に引き出す。この分析に対する事により、検出器に通過するイオンのm/zが1.36である事が明らかであるので、ステップ2.08において精緻な質量選択を行う必要がなくなり、分析時間を短縮する事も可能となる。この方法は、スクリーニングの際だけではなく、タンデム質量分析法にて精緻する場合でも有効である。第8回に示す様に、解離を行なうステップ2.09ヒヤーオンの排出を行なうステップ2.03との間に、質量分析計内に残るイオンのm/zを残すステップ2.10を設ける事で可能になる。

さらに、探知対象物の濃度が限定される事から、対象物に関するデータベースをモード処理装置上に解離しおき、このデータベースを参照しながら探知する方法は極めて効率的である。より具体的には、テンデム質量分析法を行なう場合、解離時間の長さや、解離時にエネルギーを与えるためエンドキャップ電極に印可する高周波の振幅などの最適

5 10 15 20 25

5 分な量のイオンをイオン阱にため3.02において間に込めておく必要がある。このため、典型的には、イオン阱にため時間3.0を0.4秒、質量分析時間3.0を0.05秒、選択時間3.0を0.03秒、解離時間3.0を0.01秒とし、0.5秒で質量スペクトルを1回取得する。

分析分野において、質量分析法は様々な用途に用いられている。しかしながら、探知装置に質量分析法を用いた場合では、通常の分析とは状況が異なる点がある。

まず、通常の分析では極めて多くの成分を対象としているのに対し、探知装置では極めて限られた物質を検出対象とする。例えば、爆弾は爆薬を含めて作成されるため、主要な爆薬を最初に選択して探しすれば、れば、爆弾を見つける事ができる。また、通常の分析では物質の濃度などの定性が行われるが、探知装置は対象物の有無を判定できれば良い。そこで、探知装置において初めて有効な質量分析計の動作方法を第6回を用いて説明する。イオントランプ質量分析計において、閉じ込められたイオンを外部に取り出す際、質量流量の速度によつて取り出し効率が異なる。すなわち、第6回分析時間3.03において、リンク電極間に印可する距離の増加率を増やし、短い時間で分析時間3.03が終了するようにならざると、質量分析計のみに取り出され検出まで到達するイオンが漏れ掉るため、感度が向かずという利点がある。しかしながら、分析時間3.03におけるリンク電極に印可する距離を増やすと、質量分析計が低下したり、所定のタイミングでイオンを排出されないた

値は対象となる化学物質により異なる。従って、第9図に示すように、各々の探知対象成分に対する適切な分析条件をあらかじめ調べてデータベース化しておき、高モードで特定の物質の存在が疑われた場合に、精査モードに移る際にデータベースを参照してその物質に対する最高分析条件を読み込むステップ2.1を設ける。この様にすることにより、フラッシュトイタインの良好な質量スペクトルを得られ、精度良く判定する事ができる。例えば、アンフェミンやコカインなどの様々な禁物薬物に対して、各々の最適の分析条件を開いてデータベース化しておき、アンフェミンが疑われた場合にはアンフェミン用の分析条件を、またたかがコカインが疑われた場合にはコカイン用の分析条件を呼び出して分析するなどよい。

以上、探知対象物質をイオン化し、イオンのm/zに基づいてスクリーニングする方法について説明したが、必ずしも質量分離によりイオンのm/zを検定しなくともスクリーニングを行う事ができる。第10図、11図により、イオン質量分離によりスクリーニングを行ひ本発明の第2の実施例を説明する。第10図はリング電極とエンドキャップ電極間に印加する高周波のタイミングを示す。第6図に示したように、イオノ阱に注入時間3.0とイオントラップ時間3.0を順に数けて良いが、第10図では、イオノ阱に注入する波長を同時に行う時間込み・選択時間3.0と2.304を設けた。第11図は、同じ波長・選択時間3.0と2.304にはエンドキャップ電極に印加する高周波の周波数を示す。イオントラップ質量分離計の内部に用いられたイオーンは、そのm/zに応じて共鳴しない周波数を有する。そこで、探知対象とする物質のイオーンがm/zに応じた周波数を有すると、それ以外の周波数成分を含むだ電荷を印加すると、同じ波長・選択時間3.0と2.304では難目するm/zを有するイオーンを選択し、そのイオーンを解離させて得られるイオーンを質量分析するステップ2.12（これはM/S

抽出時間3.0を数け、質量分析計内に残っているイオーンを排出させ、抽出器で抽出する。ここで、何らかの信号が得られた場合には、警報を発するなり、より詳しい検査モードに移行するなりければよい。この方法では、質量分析に要する時間が不用になるため、より高速でスクリーニングを行う事ができる。

次に、爆発物の深掘りに有効な、本発明の第3の実施例について、第12図、第13図を用いて説明する。爆癃が解離して得られるニトロ基由来のイオンでスクリーニングする方法である。ニトロ化合物はエネルギーを加えると分解しやすく、ニトロ基の部分が解離しやすい傾向がある。このため、第12図に示したように、イオノ阱にしながら解離と同時にを行う閉じ込め・解離時間3.0/2、3.0/5を設ける。第13図は、閉じ込め・解離時間3.0/2、3.0/5にエンドキャップ電極に印可する高周波の周波数を示す。探知対象とする物質のイオーンのm/zに対応した周波数(f1、f2、f3)を含み、検出するニトロ基由來のイオーンのm/zに応じた周波数(f4)を含まない信号を微弱ながらエンドキャップ電極に印可する。探知対象とする爆癃のイオーンが閉じ込められると、エンドキャップ電極に印可された高周波により共振し、エネルギーが与えられてヘリウムなどのガスで衝撃する。その際にニトロ基が解離するので、この解離したニトロ基由來のイオーン、例えばNO₂を分析時間3.0/3において検出することでスクリーニングを行う事ができる。この方法の利点は、探知対象とした物質以外のニトロ化合物が含まれていたとしても、解離したニトロ基を検出するので、発見できる事である。以上に示した方法において、選択性を更高なものとすなわち、フランメントにおいては更に高次の質量分析を行っても良い。すなわち、フランメントトイオンの中から特定のm/zを有するイオーンを選択し、そのイオーンを解離させて得られるイオーンを質量分析するステップ2.12（これはM/S

5 5 10 15 20 25

5 5 10 15 20 25

/MS /MSまたはMS^{*}と呼ばれる) を駆けても良い。このような装置、検査、質量分析の複数は、選択性が満足されるまで繰り返すことができる(一般にMSと呼ばれる)。

本実験において、前述のスクリーニング時と精査時では、探しに要する時間が異なる。そこで、第1 5回に示す様に、本実験による採知装置を荷物の搬送装置5 7と組み合わせて使用することを。搬送装置5 7、搬送装置開閉装置5 8、採知装置本体5 3とを信号ライン5 9 a、5 9 bにて接続する。スクリーニング時は一定速度で搬送を行なうが、本体5 3が検査モードに切り替わって数秒の時間をかけて採知を行う場合には、搬送装置5 7の搬送速度を選くるなどの操作を行うと良い。

以上、本実験によれば、前述かつ高選択性を有する採知が可能になり、荷物や人の流れを妨げることなく対象物質の有無を調べることができるようになつた。

10

以上、本実験によれば、前述かつ高選択性を有する採知が可能になり、荷物や人の流れを妨げることなく対象物質の有無を調べることができるようになつた。

11

請求の範囲

1. イオントラップ質量分析計を用いた探知方法において、質量スペクトルを取得する第1の分析ステップと、第1の温度のm/zのイオンが存在するか判定する第1の判定ステップと、前記第1の判定ステップの判定結果に応じてタンデム質量分析を行う第2の分析ステップと、前記タンデム質量分析で得られた質量スペクトルで第2の温度のm/zのイオンが存在するか判定する第2の判定ステップと、からなることを特徴とするイオントラップ質量分析計を用いた探知方法。
- 12
2. イオントラップ質量分析計を用いた探知方法において、質量スペクトルを取得する第1の分析ステップと、第1の温度のm/zのイオンが存在するか判定する第1の判定ステップと、前記第1の判定ステップの判定結果に応じて分析条件をデータベースから読み込むステップと、タンデム質量分析を行う第2の分析ステップと、第2の温度のm/zのイオンが存在するか判定する第2の判定ステップとを有することを特徴とするイオントラップ質量分析計を用いた探知方法。
- 13
3. 前記第2の判定ステップの判定結果に基づいて音報を発動する告知ステップを有する請求の範囲第1項又は第2項記載のイオントラップ質量分析計を用いた探知方法。
- 14
4. 前記第2の分析ステップは、第1の温度のm/zのイオンを閉じ込める閉じ込めステップと、前記閉じ込められたイオンから特定のm/zを有するイオンを選択する選択ステップと、前記選択ステップで選択されたイオンを挿引する挿引ステップと、を有することを特徴とする請求の範囲第1項記載のイオントラップ質量分析計を用いた探知方法。
- 15
5. 質量分析出する工場の後に排出したイオンの電流値を計測するスケップを付加したことを特徴とする請求の範囲第3項記載のイオントラップ

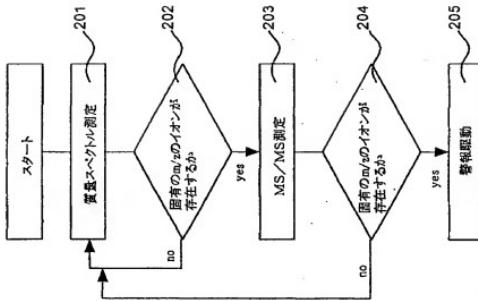
質量分析計を用いた採取方法。

6. 前記第2の分析ステップは、第1の固有のm/zのイオンを阱じ込める閉じ込めステップと、前記閉じ込めたイオンを捕獲させる解離ステップと、前記イオンの解離により生成されたニトロ基由来のイオンを質量分析する第3の分析ステップからなることを特徴とする請求の範囲構成分析装置のイオントラップ質量分析計を用いた採集方法。

7. 第1のガスを吸引するガス吸引部と、コロナ放電により前記第1のガスに含まれる試料をイオン化するイオン源と、前記イオン源で生成した第1のイオンを分析するイオントラップ質量分析計と、前記イオントラップ質量分析計からの所定イオンに含まれる危険物質を判定する判定部と、を具備することを特徴とするイオントラップ質量分析装置を用いた採集装置。

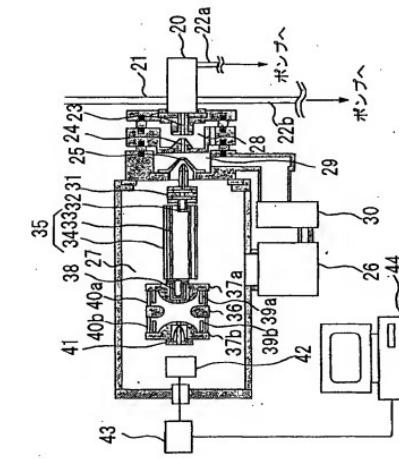
8. カバンなどのチェックすべき対象を搬送する搬送装置と、第1のガスを吸引するガス吸引部と、コロナ放電により前記第1のガスに含まれる試料をイオン化するイオン源と、前記イオン源で生成した第1のイオンを分析するイオントラップ質量分析計と、前記イオントラップ質量分析計からの所定イオンに含まれる危険物質を判定する判定部と、危険物質が含まれると判定されると前記搬送装置の搬送速度を制御する搬送装置制御部を具備することを特徴とするイオントラップ質量分析装置を用いた採集装置。

10 15 20

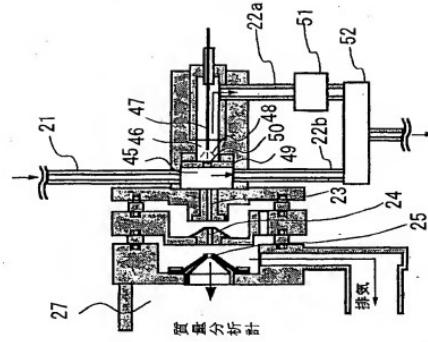


第1図

2/12

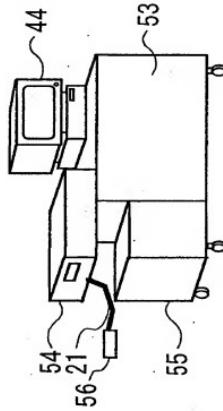


第2図

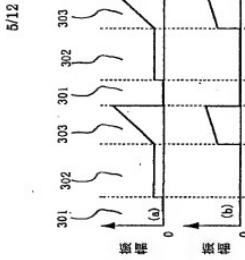


第3図

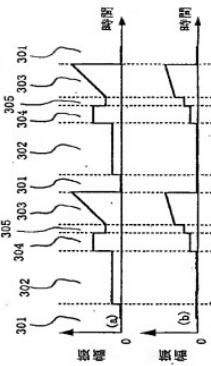
4/12



第4回



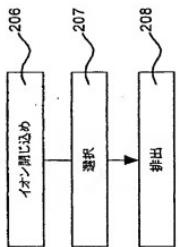
(a) リング電極に印加する高周波の振幅
 (b) エンドキャップ電極に印加する高周波の振幅



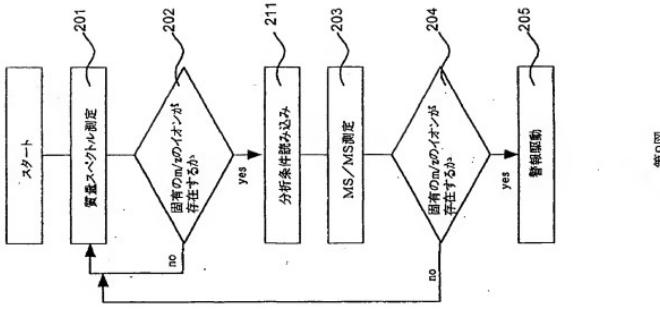
(a) リング電極に印加する高周波の振幅

卷之四

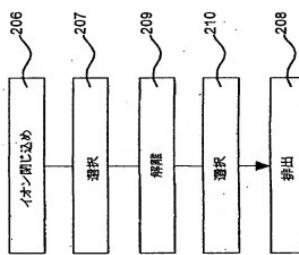
6/12



第7図

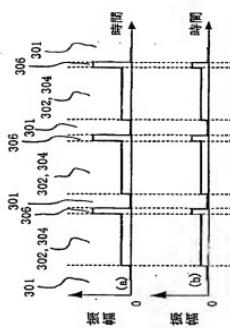


第9図



第8図

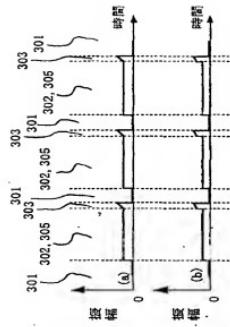
8/12



(a) リング電源に印加する高周波の振幅
(b) エンドキヤップ電源に印加する高周波の振幅

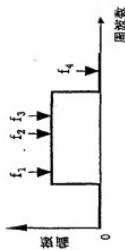
第10図

9/12



(a) リング電源に印加する高周波の振幅
(b) エンドキヤップ電源に印加する高周波の振幅

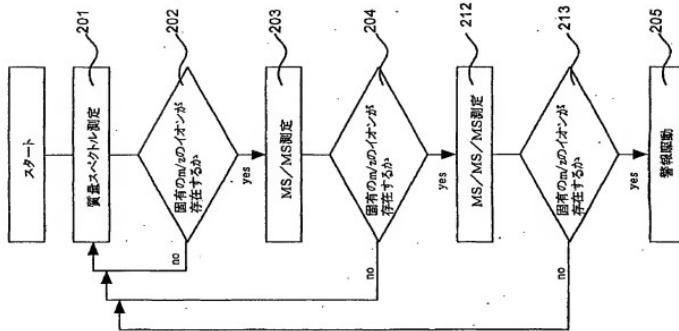
第11図



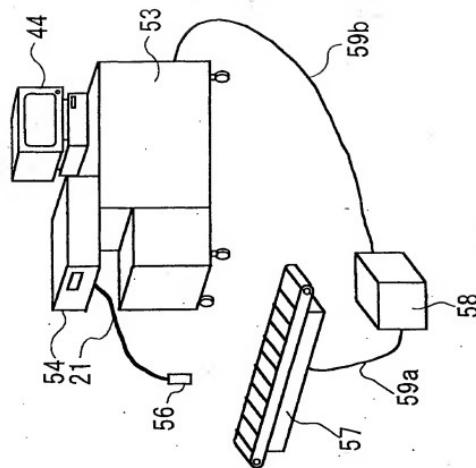
第13図

10/12.

11/12



第14図



第15図

19/12

CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classifications and IPC

Documentation searched other than our main documentation to the extent that such documents are included in the Gold standard

JJ Iauyo Shinan Koho	1922-1995	Toreku Jitsuyou Shinan Koho	1994-2000
Kokai Jitsuyou Shinan Koho	1971-2000	Jitsuyou Shinan Toreky Koho	1996-2000

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

16

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC	
Int. Cl.: G01N27/62, G01N49/42			
B. FIELDS SEARCHED			
Document examined other than maximum documents to whom correspondence of the relevant passages followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62 - 27/70, H01J49/00-49/8			
Maximum document consulted (classification system followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62, G01N49/42			
Documentation searched other than maximum documents to whom correspondence of the relevant passages followed by classification symbols)			
Document examined other than maximum documents to whom correspondence of the relevant passages followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62 - 27/70, H01J49/00-49/8			
Maximum document consulted (classification system followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62, G01N49/42			
B. FIELDS SEARCHED			
Document examined other than maximum documents to whom correspondence of the relevant passages followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62 - 27/70, H01J49/00-49/8			
Maximum document consulted (classification system followed by classification symbols)			
Int'l. Cl.: G01N27/62, G01N49/42			
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT			
Category	Character of document; with indication, where appropriate, of the relevant passages	Reference to claim No.	
A	Claim 1 of document, with reference, where appropriate, of the relevant passages		
X	JP 2000-23579 A (Hitachi, Ltd.), 28 January, 2000 Full text; Page 1 to 39	1-5	
Y	Full text; Page 1 to 29 (Family: none)	7 8	
A	JP 57-148866 A (Hitachi, Ltd.), 14 September, 1982 (14-09-82), Full text; Page 1 to 3 (Family: none)	1-6	
Y	JP 11-20918 A (Hitachi Medica Corporation), 27 August, 1999 (27-08-99), Full text; Page 1 to 10 (Family: none)	8	
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT			
<input type="checkbox"/>	Further documents are listed in the continuation of Box C.	<input type="checkbox"/>	Specified family names.
<input type="checkbox"/>	Special and unique features.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	Specific and unique features of one or more which is not claimed as an invention in the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	Earlier document published as or after the International filing date or priority date of the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	One or more which is not claimed as an invention in the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	One or more which is not claimed as an invention in the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	One or more which is not claimed as an invention in the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
<input type="checkbox"/>	One or more which is not claimed as an invention in the application to which it refers.	<input type="checkbox"/>	One document published in the International filing date or priority date and not in conflict with the application to which it refers.
D. DETAILS OF THE INTERNATIONAL SEARCH			
Date of the search compilation of the International search report			
29 November, 2000 (29.11.00)			
Date of mailing of the International search report			
12 December, 2000 (12.12.00)			
Authorized officer			
Telephone No.			
Name and mailing address of the IBAU			
Japanese Patent Office			
Postal code and city/town/village			

第四部分：公眾參與 / 公眾參與（上）

Int.Cl' G01N27/62, H01J49/42

開拓を行った分野
行つた最小限資料（国際特許分類（IPC））

卷之三

資料以外の資料で開拓を行った分野に含まれるもの	
日本通商異業新興公報	1922-1936年
日本全国開拓利用新業公報	1971-2000年
日本全国異業新興技術新業公報	1994-2000年
日本全国異業新業新興公報	1996-2000年

本工作用 | 文檔子項一合合—7 (共一卷之六書 | 資料工作用) 全用題

研究者と認められる文獻
の範囲
リーフレット等及び一般の書籍が該當するときは、その開拓する場所の新規

JP, 2000-28579, A (株式会社 日立製作所)
2.8.1. B, 2000 (28. 01. 00)
金文, 第1-9圖
金文, 第1-9圖
(7.7.2. B, 2000 (28. 01. 00))

J P, 57-148866, A (株式会社日立製作所)
14. 9月. 1982 (14. 09. 82)

主文、用1-3回（ノーミニマム）

卷之三

卷之三

登録を終了した日	登録を開始した日	直前までの登録料	登録料の支払方法
29.11.00	29.11.00	12,1200	現金または銀行振込(現金のみ支払可)

日本国脚印 (ISA/JP)
郵便番号 100-8915
東京都千代田区霞が関三丁目4番3号
電話番号 03-3581-1101 内線 3292

EI/13A/210 (JZ&J) (1998年7月)

根式PCII/13A/210(第2版) (1998年7月)